

応用問題のための高品質数値シミュレーション手法のデザイン

野津裕史（金沢大学・数物科学系 / JST さきがけ）

AIMaP集会：令和の時代における数理科学の社会的役割

2019年11月22日

- 流体シミュレーションの数理(1). 数学セミナー, 2019年4月号, pp.68-72.
- 流体シミュレーションの数理(2). 数学セミナー, 2019年5月号, pp.81-85. 1

自己紹介

専門：偏微分方程式の数値解析（流れ問題中心）

研究の興味：

- 有限要素法
- 数値解析（数値解の安定性、厳密解への収束性）
- 粘性流体
- 粘弾性流体
- ラグランジュ座標（粒子の軌跡、特性曲線）
- アダプティブメッシュリファインメント (AMR)
- 2、3次元数値シミュレーション
- 現象や数理モデルの構造

数値解析

Δt : 時間刻み幅, h : 空間刻み幅
ある仮定の下で, 次が成り立つ.

$$\|(\text{数値解})\| \leq c(\|(\text{初期値})\| + \|(\text{外力})\|) \quad (\text{安定性})$$

$$\|(\text{数値解}) - (\text{厳密解})\| \leq c(\Delta t^a + h^b) \quad (\text{収束性})$$



数値シミュレーションは（発散せずに）安定に実行できて、
 Δt と h を小さくすると、数値解は厳密解に近づく。

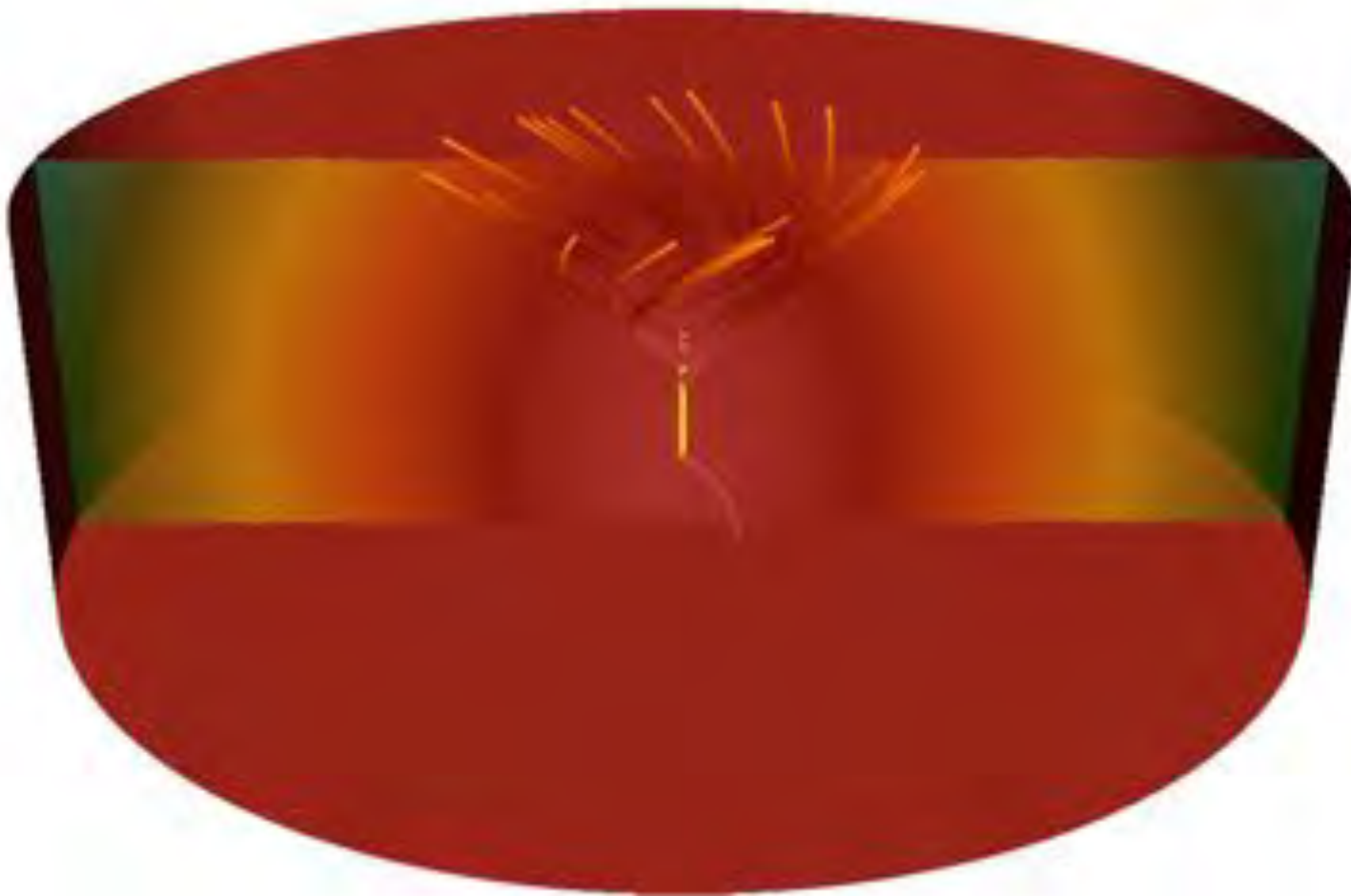
- 竜巻旋回流の計算

- 許本源 (東京大学)

- 米田剛 (東京大学)

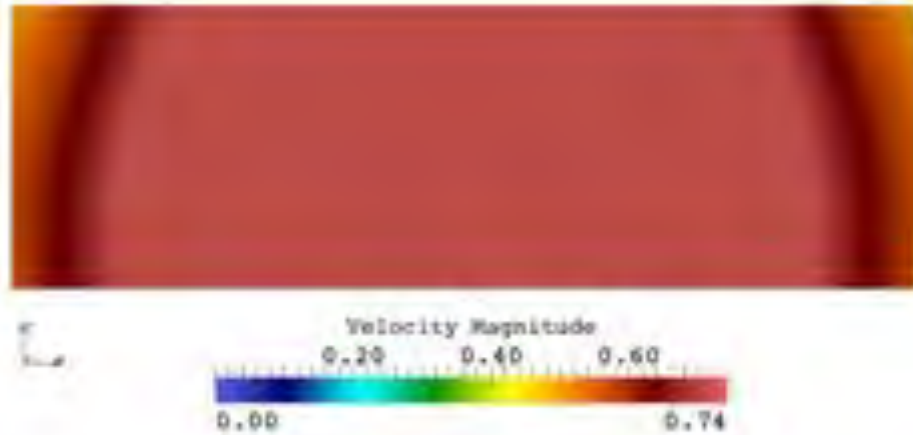
- Afifah Maya Iknaningrum (金沢大学D1)

Ref. [P.-Y. Hsu, H. Notsu and T. Yoneda. *Journal of Fluid Mechanics*, 2016.]

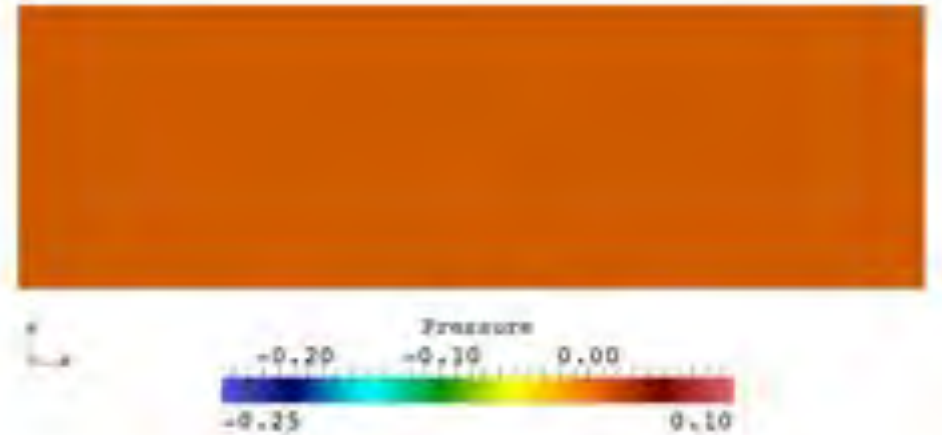


集中のみ（旋回なし）

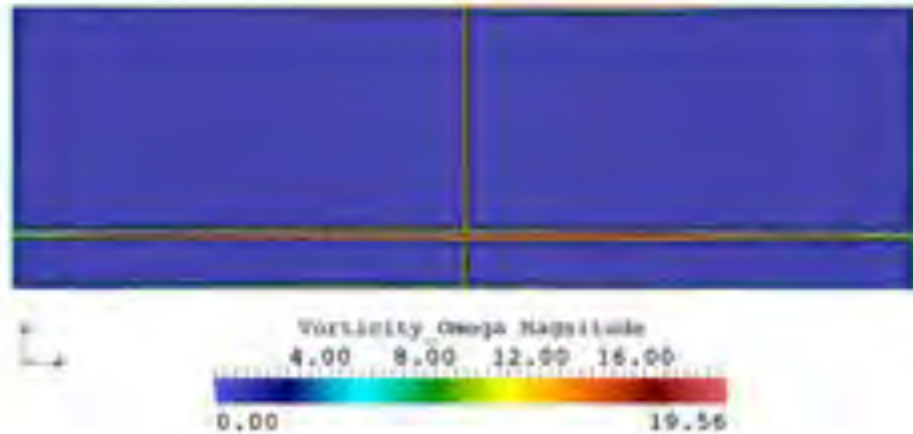
流速（絶対値）



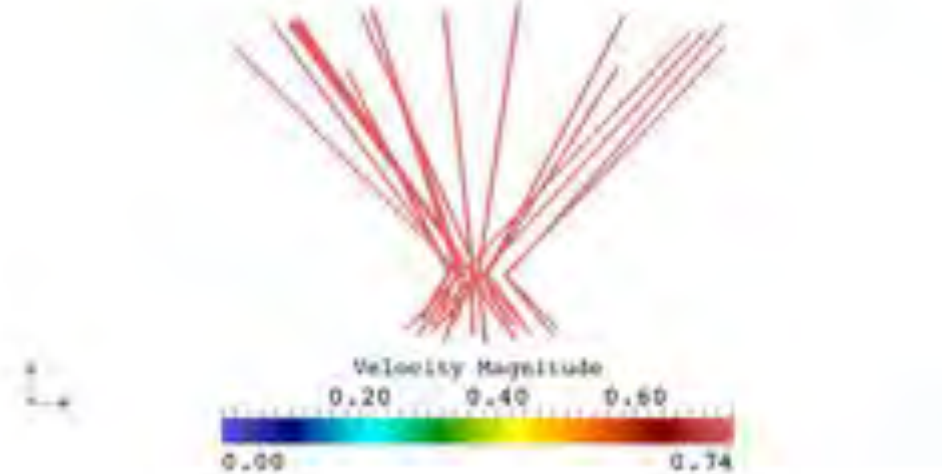
圧力



渦度



流線



Re=50,000

集中+巡回

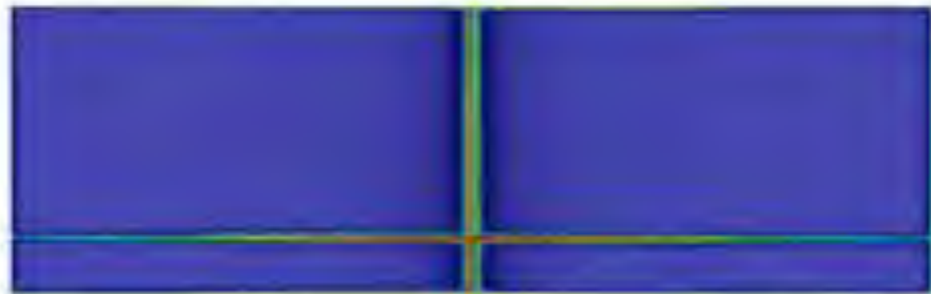
流速 (絶対値)



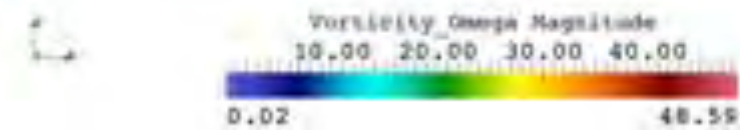
圧力



渦度



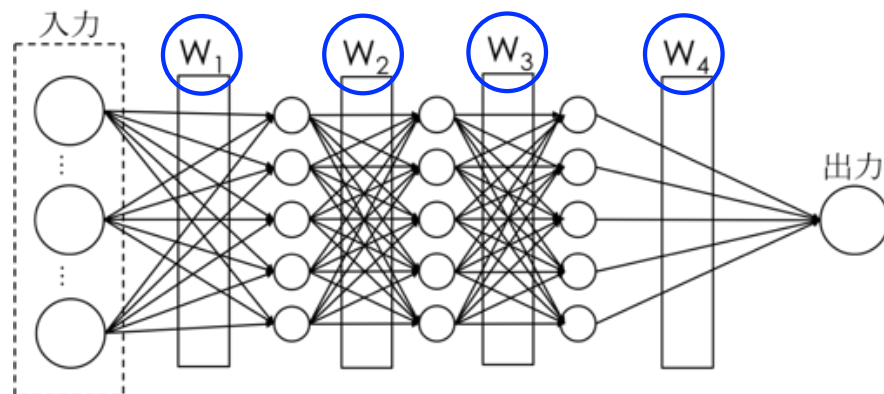
流線



Re=50,000

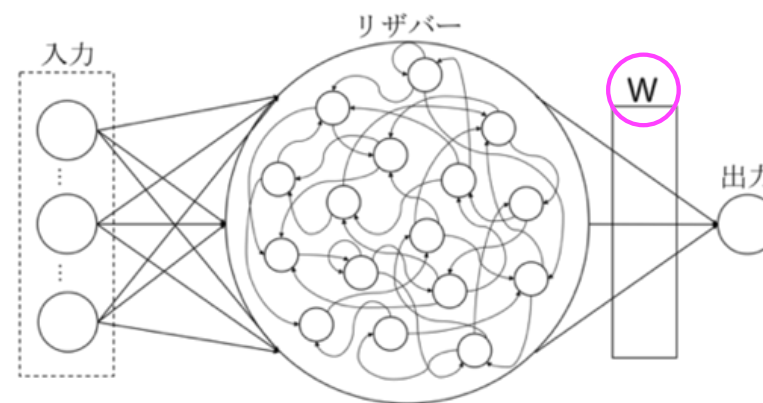
-
- 物理リザーバー計算
 - 後藤健 (金沢大学M2)
 - 中嶋浩平 (東京大学)

機械学習とリザーバー計算



従来の機械学習(DLなど)のイメージ

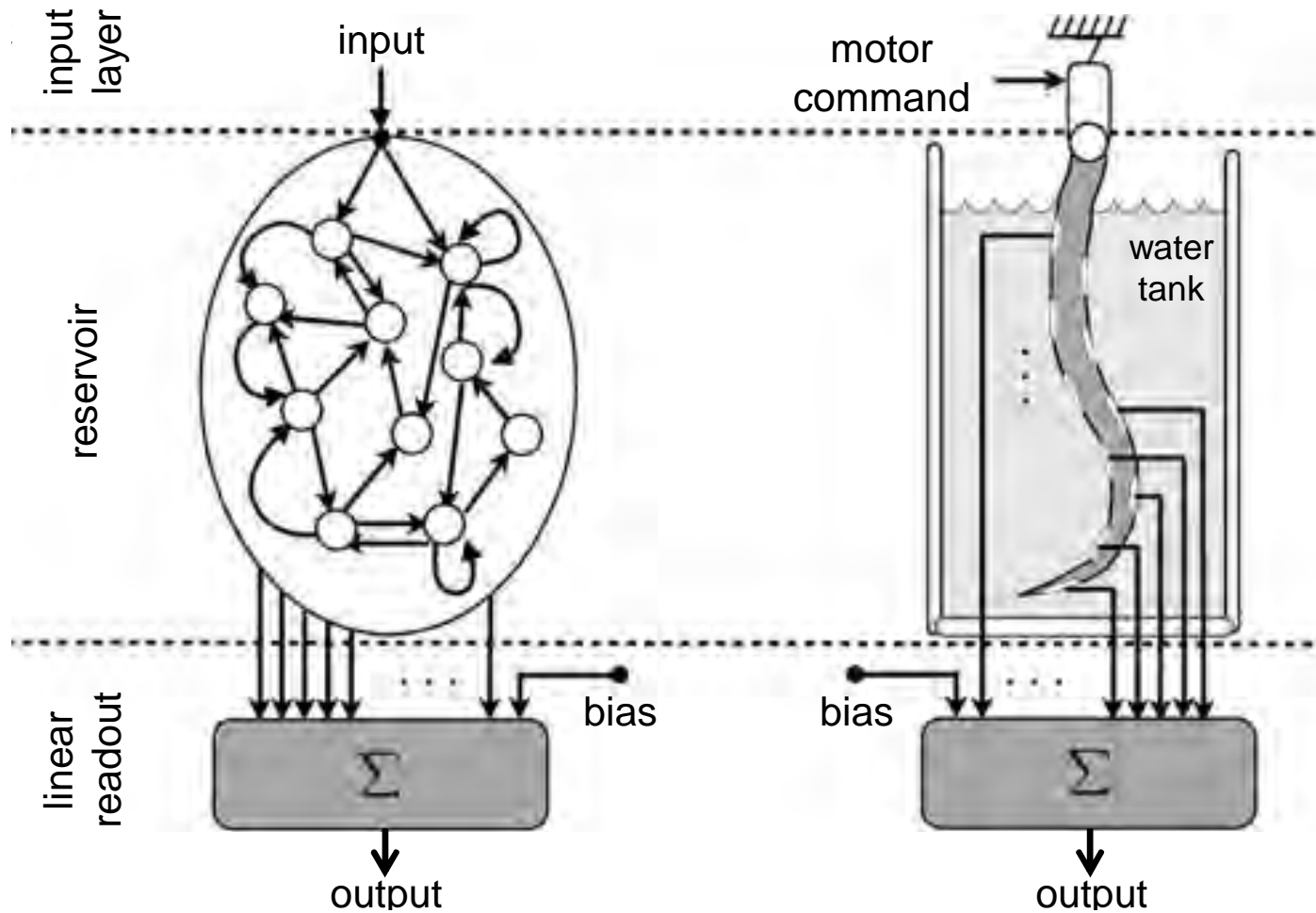
重み W_1 -- W_4 を最適化。
層を増加→複雑な関数表現可能。



リザーバー計算のイメージ

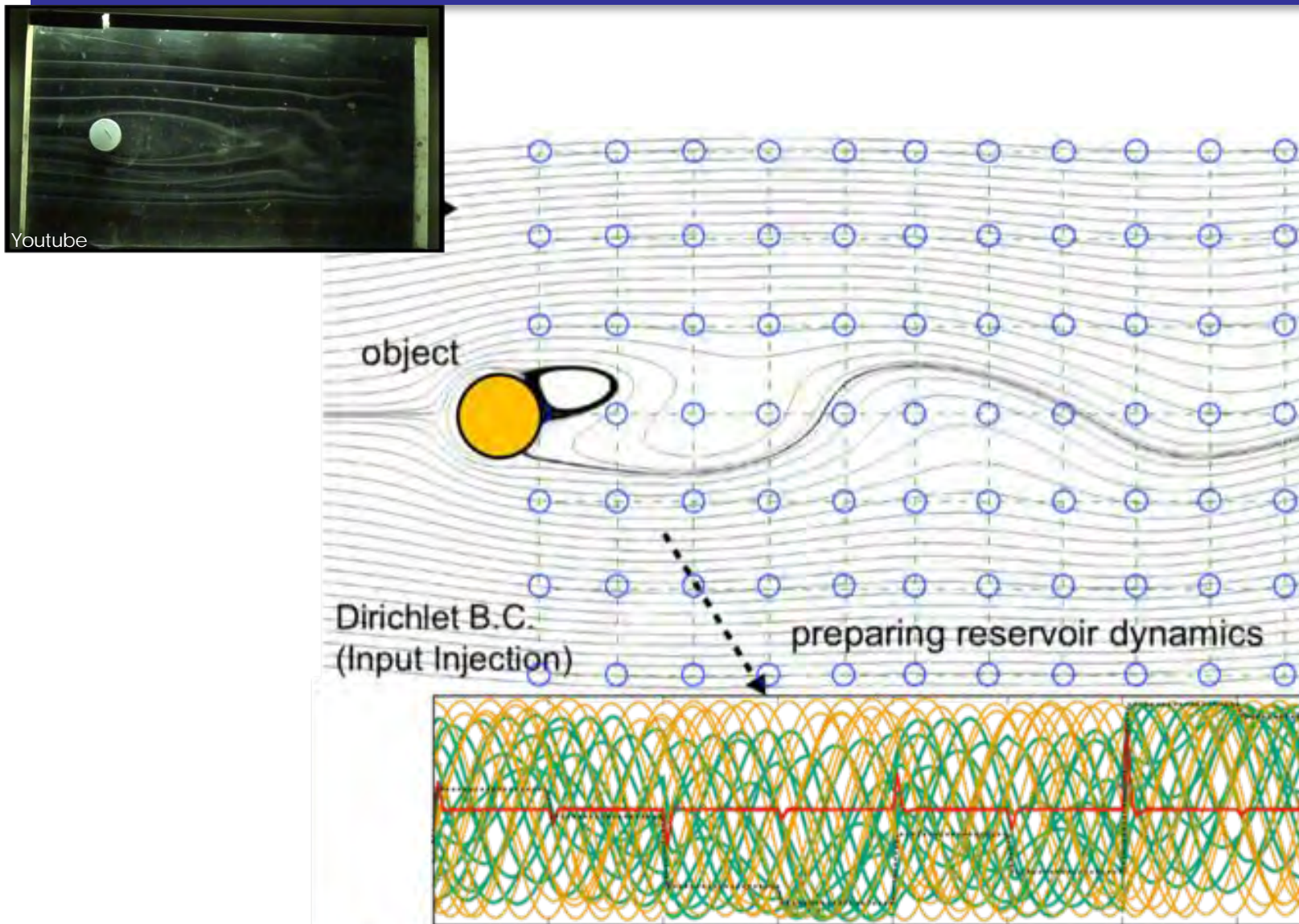
アウプット直前の重み W だけ
を最適化。

物理リザーバー計算：例 1



[Nakajima et. al., Scientific Reports, 2015.]

カルマン渦でバーチャル物理リザーバー計算

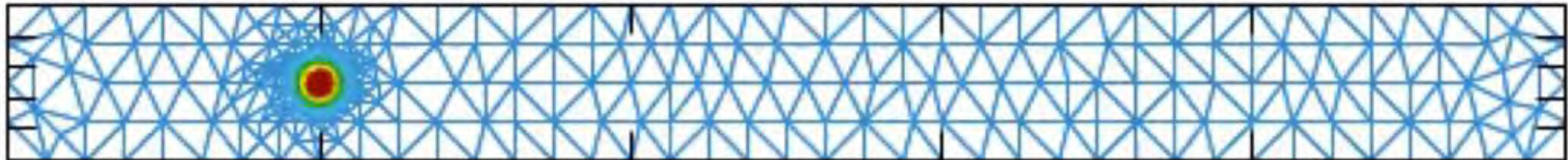


[Goto-Nakajima-Notsu. Computing with vortices: Bridging fluid dynamics and its information-processing capability.]

-
- アダプティブ メッシュ リファインメント
 - 二井滉太 (パナソニックシステムワークス開発研究所、2018修士卒)

アダプティブ メッシュ リファインメント (AMR)

- 膨大な計算量
 - 「急激に変化する」関数の近似
 - 「急激に変化する」場所は時間とともに変わる
- 計算の精度を上げたい
 - 基本的にメッシュが細かければ計算精度は上がると期待される
 - ただし、メッシュが細かいと計算には時間がかかる



- 固定メッシュで成立する既存の数値解析理論が機能しなくなる
- ALBERTA のアイデアを利用 $\rightarrow V_h^{ORG} \subset V_h^n$
- 通常用いられるツリー構造ではなくメッシュをアップデート
 \rightarrow 既存の固定メッシュ用プログラムを活用

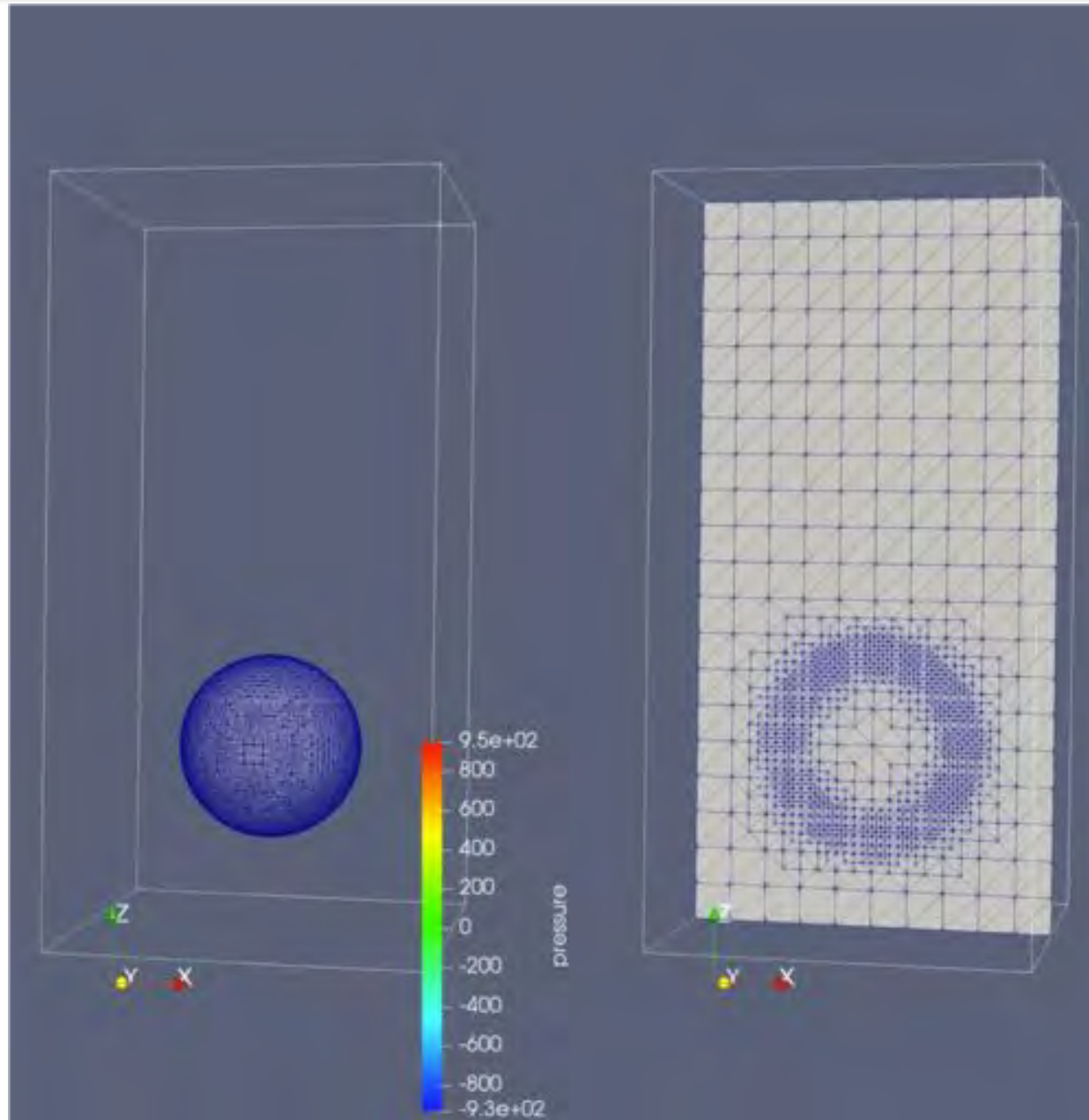
Ref. [A. Schmidt and K.G. Siebert. Springer, Berlin, 2005.]

- ライジング バブル

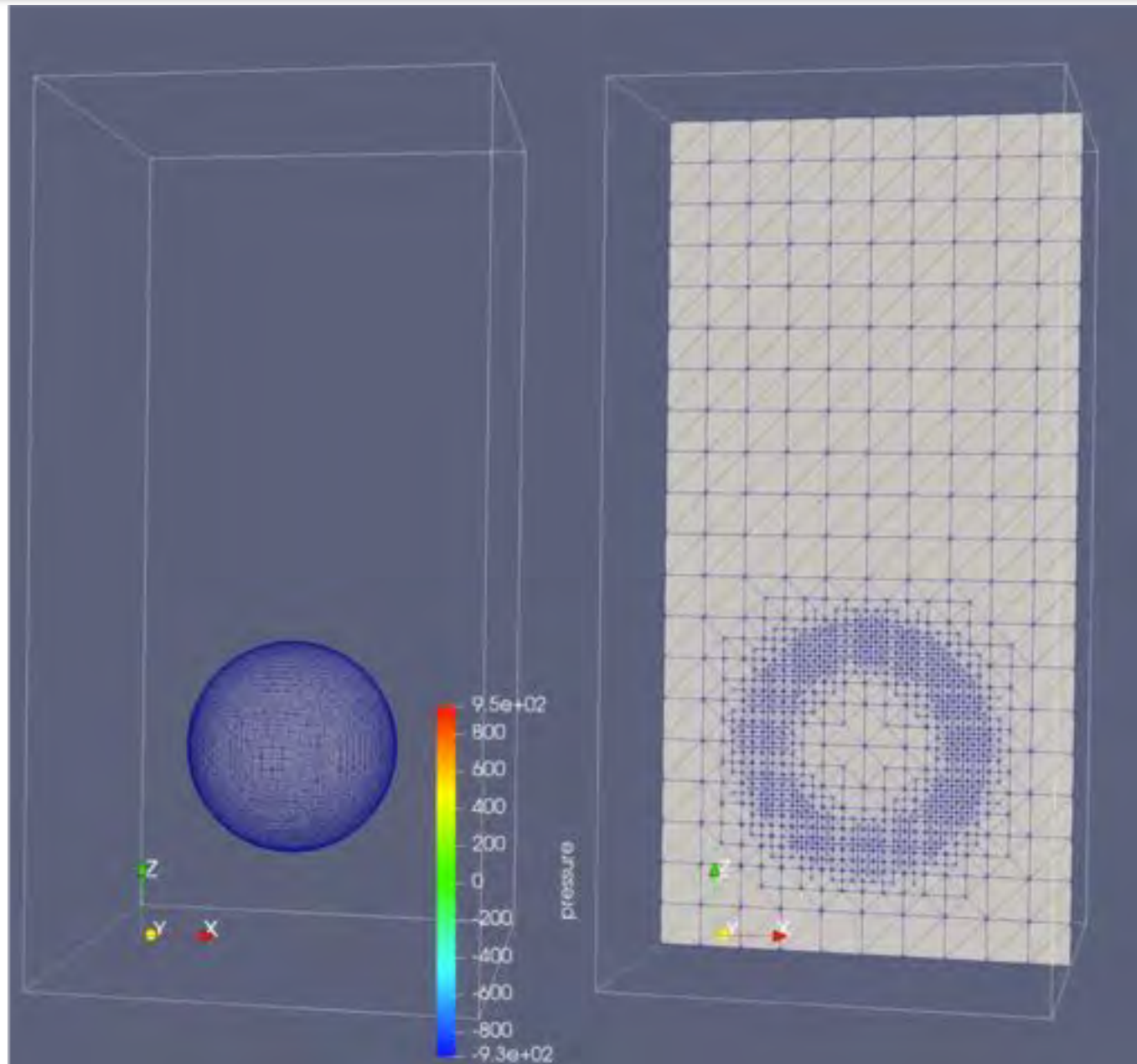


Air Bubbles Rising in Water:
<https://www.youtube.com/watch?v=NjB7LXSQoQc>

2流体問題



2流体問題



ところで...

- 経験的に、共同研究を始めて2年くらいのころに新しい結果が始める。
- まとめ始めていろんな課題が出てきて、最終的に3年くらいで論文になる
- 高品質、とくに、数学的な信頼性によってふんばる

→

- 博士後期課程を前向きに考えてみませんか？
- 社会人ドクターはいかがでしょうか？

微分方程式とデータサイエンス研究会

研究会趣旨

機械学習やビッグデータなど、データサイエンス分野における数学研究および数学教育の重要性が昨今高まっており、特にこれまであまり接点の多くなかった微分方程式分野との関連が注目されている。本研究会では、微分方程式や数値解析の手法やアイデアを生かした機械学習やビッグデータの解析手法を広く取りあげること、参加者間の情報共有を図り、解析学・応用数学分野の研究者が参入しやすい新たなデータサイエンスの研究方向や教育システムの開拓を目指す。2～3月程度に1度の割合で不定期に開催する。

第1回

- ・日 時：2019年11月22日（金）16:00-18:00
- ・場 所：金沢大学角間キャンパス 自然研5号館 223室

- ・講演者：本多泰理氏（東洋大学 情報連携学部 情報連携学科）
- ・題 目：Analysis on graphon-based reservoir computing
- ・要 旨：

時系列データ解析に適した機械学習の枠組みの一つとして reservoir computing が注目されている。Reservoir computing は RNN (recurrent neural network) の一種であるが、中間層における重みパラメータを固定し、出力層における重みパラメータのみ学習するというアプローチにより、誤差伝播における勾配損失問題や計算コストの増大を防ぐ効果が期待される。その定式化には、echo state network (ESN) と liquid state machine (LSN) という大きく2つのルーツが存在するが、ここでは主に ESN による定式化に着目して議論を進める。ESN では、中間層 (reservoir) は一般に非線形の活性化関数をもつ再帰的なネットワークにより構成されるが、その適切な動作の条件として知られるいくつかの性質 (echo state property, edge of chaos 等) を満たすことが望ましいとされる。

本講演では、reservoir computing における中間層のネットワークをグラフの連続極限として知られる graphon/digraphon としてまず定義し、そこからサンプリングを行うことを提案する。また時間に関しても連続的な極限を考え、連続時間の力学系として echo state property を満たすように graphon/digraphon を構成し、その時間・空間に関する離散版として ESN を捉えることで、echo state property がどこまで満たされるかを議論する。

第2回

- ・日 時：2019年11月27日（水）15:00-18:00
- ・場 所：金沢大学角間キャンパス 自然研5号館 223室

- ・講演者：園田翔氏（理化学研究所 革新知能統合研究センター）
- ・題 目：連続モデルによるニューラルネットの解析
- ・要 旨：

今日のニューラルネットは数億個にもものぼるパラメータをもつ巨大な学習機械である。学習後のパラメータの解釈は困難であることから、しばしばブラックボックスと呼ばれる。講演者は、ニューラルネットを連続化することでブラックボックスの仕組みを理解する研究に取り組んでいる。連続化理論には2種類あり、1つの中間層を連続化する幅方向の理論（積分表現理論）と、中間層同士の繋がりを連続化する深さ方向の理論（輸送解釈、ODE-Net）からなる。幅方向の理論は関数解析や調和解析の対象として学習機械を調べる理論であり、歴史的な経緯から従来の統計的学習理論とも相性がよい。一方、深さ方向の理論は微分方程式論の対象として学習機械を調べる理論であり、機械学習の文脈では比較的新しい切り口の研究である。本講演では、まず幅方向の理論について説明し、次に深さ方向の理論を説明する。

幹事

- ・大塚浩史（金沢大学）
- ・木村正人（金沢大学）
- ・野津裕史（金沢大学）

後援

- ・金沢大学 数理科学連携研究拠点 (MIRS)
- ・金沢数理データサイエンス研究会
- ・金沢解析セミナー